

**Simulación Biomolecular**

Código: 102517  
Créditos ECTS: 6

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2502444 Química	OT	4	0

**Contacto**

Nombre: Laura Masgrau Fontanet  
Correo electrónico: Laura.Masgrau@uab.cat

**Uso de idiomas**

Lengua vehicular mayoritaria: catalán (cat)  
Algún grupo íntegramente en inglés: No  
Algún grupo íntegramente en catalán: Sí  
Algún grupo íntegramente en español: No

**Equipo docente**

Àngels González Lafont

**Prerequisitos**

Termodinámica Química  
Química Cuántica  
Química Física

**Objetivos y contextualización**

El objetivo de esta asignatura es introducir al alumnado los principios básicos de la simulación biomolecular como herramienta para interpretar a nivel atómico como se desarrollan los procesos biológicos y las aplicaciones biomédicas y biotecnológicas de las biomoléculas (fármacos, nanopartículas, vacunas...).

La simulación biomolecular se basa en la modelización molecular del sistema biológico o biomolécula, lo que implica una serie de etapas que es trabajar en este curso tanto a nivel teórico como práctico:

- 1) Cálculo de la energía del sistema para una disposición (estructura 3D) dada de sus átomos y moléculas utilizando métodos de la Mecánica Molecular y de la Mecánica Cuántica;
- 2) Estudio de las técnicas computacionales que permiten determinar la variación de la energía del sistema en función de sus coordenadas:
  - a) Técnicas de Docking;
  - b) Técnicas de minimización de la energía;
  - c) Técnicas de Dinámica Molecular;
  - d) Métodos de cálculo de la energía libre.

Paralelamente se utilizarán dichos métodos tanto para el estudio de aspectos básicos de las biomoléculas y sus funciones, como en aplicaciones al diseño de fármacos y al estudio de la catálisis enzimática.

## Competencias

- Adaptarse a nuevas situaciones.
- Aprender de forma autónoma.
- Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
- Demostrar iniciativa y espíritu emprendedor.
- Demostrar que comprende los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales de las diferentes áreas de la Química.
- Gestionar la organización y planificación de tareas.
- Gestionar, analizar y sintetizar información.
- Interpretar los datos obtenidos mediante medidas experimentales, incluyendo el uso de herramientas informáticas, identificar su significado y relacionarlos con las teorías químicas, físicas o biológicas apropiadas.
- Mostrar sensibilidad hacia temas medioambientales.
- Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos.
- Proponer ideas y soluciones creativas.
- Razonar de forma crítica.
- Reconocer y analizar problemas químicos y plantear respuestas o trabajos adecuados para su resolución, incluyendo en casos necesarios el uso de fuentes bibliográficas.
- Resolver problemas y tomar decisiones.
- Trabajar en equipo y cuidar las relaciones interpersonales de trabajo.
- Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información.

## Resultados de aprendizaje

1. Adaptarse a nuevas situaciones.
2. Analizar trayectorias de dinámica molecular.
3. Aprender de forma autónoma.
4. Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
5. Demostrar iniciativa y espíritu emprendedor.
6. Determinar los cambios estructurales y energéticos asociados a un camino de reacción química.
7. Distinguir entre los métodos computacionales aplicados a las biomoléculas.
8. Gestionar la organización y planificación de tareas.
9. Gestionar, analizar y sintetizar información.
10. Manejar a nivel básico la simulación por ordenador.
11. Manejar la metodología básica de la química cuántica y mecánica molecular.
12. Mostrar sensibilidad hacia temas medioambientales.
13. Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos.
14. Plantear simulaciones en fase condensada.
15. Producir simulaciones de interacciones proteína-ligando.
16. Proponer ideas y soluciones creativas.
17. Razonar de forma crítica.
18. Reconocer las bases de los sistemas operativos y lenguaje informáticos.
19. Resolver problemas y tomar decisiones.
20. Trabajar en equipo y cuidar las relaciones interpersonales de trabajo.
21. Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información.
22. Visualizar biomoléculas y ciertas propiedades estructurales por medio de programas de visualización.

## Contenido

### SIMULACIÓN BIOMOLECULAR

1. Biomoléculas: estructura y función.

2. Introducción a la modelización molecular de biomoléculas.
3. Métodos de Mecánica Molecular para el cálculo de la energía.
4. Exploración conformacional en biomoléculas.
5. Interacción proteína-ligando: Técnicas de Docking y diseño de fármacos.
6. Métodos de simulación: Dinámica Molecular.
7. Métodos híbridos de cálculo de la energía potencial: QM/MM
8. Cálculos de diferencias de energía libre.
9. Catálisis enzimática: mecanismos y velocidad de reacción.

## Metodología

La asignatura de SIMULACIÓN BIOMOLECULAR es una optativa de 6 ECTS perteneciente a la mención de QUÍMICA BIOLÓGICA.

La metodología docente de la asignatura consiste en clases teóricas en el aula y en clases prácticas dirigidas por el profesorado responsable de la asignatura en el aula informática. Las clases teóricas y prácticas se cumplimentarán con horas de tutoría supervisadas por el equipo docente para la resolución de dudas. El alumnado tendrá que trabajar también de forma autónoma sobre los contenidos teóricos y las cuestiones planteadas en las sesiones presenciales, las prácticas, así como en la elaboración de trabajos y entregas que requerirán una parte de búsqueda bibliográfica.

## Actividades

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Clases teóricas	34	1,36	2, 6, 7, 10, 11, 14, 15, 18, 22
Sesiones prácticas	18	0,72	2, 7, 8, 9, 10, 11, 14, 15, 17, 18, 19, 21, 22
Tipo: Supervisadas			
Tutorías	2	0,08	8, 9
Tipo: Autónomas			
Búsquedas bibliográficas	2	0,08	9, 13
Estudio	70	2,8	1, 2, 3, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 14, 15, 17, 18, 19
Quizzes/Informes de prácticas/Entregas de trabajos	14	0,56	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22

## Evaluación

Esta asignatura utiliza la evaluación continuada para ayudar y valorar el proceso de aprendizaje de contenidos y competencias por parte del alumnado.

Esta evaluación continuada constará de dos tipos de actividades: exámenes y actividades de seguimiento.

Exámenes (70% de la nota total)

Se realizarán dos exámenes parciales sobre el contenido de la asignatura: Parcial 1 (P1) (35%) y Parcial 2 (P2) (35%).

Actividades de seguimiento (30%)

A lo largo del curso se realizarán dos series (S1 y S2) de actividades de seguimiento (quizzes, informes de prácticas, trabajos) que servirán como evidencias del trabajo individual del alumno y de su aprendizaje. Estas actividades no son recuperables.

### CALIFICACIONES

Para superar la asignatura por curso deben cumplirse las tres condiciones siguientes:

1) Nota de cada parcial (NP1 y NP2) igual o superior a 3,5 y la nota mínima media de los dos exámenes es 4,0 (todo esto sobre una escala de 10).

2) Nota Final asignatura =  $0,70 * (0,50 * (NP1 + NP2)) + 0,30 * (0,50 * (NS1 + NS2))$  igual o superior a 5,0.

3) Haber asistido a todas las sesiones de prácticas.

Si no se llegara a los mínimos 1) y/o 2), al final del curso se podrá recuperar uno o los dos exámenes parciales. La nota obtenida en la recuperación sustituirá a la obtenida en el primer intento.

La realización de las prácticas es obligatoria.

También será posible presentarse al examen de recuperación con el objetivo de mejorar nota. En estos casos, también las notas obtenidas en las recuperaciones sustituirán las notas obtenidas en los primeros intentos.

Para participar en la recuperación es necesario haber sido previamente evaluado en un conjunto de actividades el peso de las cuales equivalga a un mínimo de dos terceras partes (66,6 %) de la calificación total de la asignatura. No es posible, así, hacer la recuperación de un examen parcial que no se haya hecho.

Si el alumno sólo ha sido evaluado como máximo de un 25% de las pruebas y abandona, la calificación final será de NO EVALUABLE.

### Actividades de evaluación

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Actividades de seguimiento	30%	4	0,16	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22
Exámenes	70%	6	0,24	1, 3, 4, 5, 7, 8, 9, 11, 16, 17, 19, 21

### Bibliografía

1) Introduction to Computational Chemistry. Frank Jensen. ISBN: 0470011874 JohnWiley & Sons Ltd. (2007).

2) Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models. Cristopher J. Cramer. ISBN: 0470091827. JohnWiley & Sons Ltd. (2004).

3) Molecular Modelling. Principles and Applications. Andrew R Leach. ISBN: 978-0-582-38210-7. Pearson (2001).